

ReaxFF Force Field Parameter File

Supporting information for the manuscript by K. Chenoweth, A.C.T. van Duin, M.-J. Cheng, P. Persson, J. Oxgaard, and W.A. Goddard III entitled "Development and Application of a ReaxFF Reactive Force Field for Oxidative Dehydrogenation on Vanadium Oxide Catalysts"

Reactive MD-force field

```
39      ! Number of general parameters
50.0000 !p(boc1)
 9.5469 !p(boc2)
26.5405 !p(coa2)
 1.5105 !p(trip4)
 6.6630 !p(trip3)
 0.0000 !kc2
 1.0588 !p(ovun6)
 4.6000 !p(trip2)
12.1176 !p(ovun7)
13.3056 !p(ovun8)
-70.1292 !p(trip1)
 0.0000 !Lower Taper-radius (swa)
10.0000 !Upper Taper-radius (swb)
 0.0000 !not used
33.8667 !p(val7)
 6.0891 !p(lp1)
 1.0563 !p(val9)
 2.0384 !p(val10)
 6.1431 !not used
 6.9290 !p(pen2)
 0.3989 !p(pen3)
 3.9954 !p(pen4)
 0.0000 !not used
 5.7796 !p(tor2)
10.0000 !p(tor3)
 1.9487 !p(tor4)
 0.0000 !not used
 2.1645 !p(cot2)
 1.5591 !p(vdW1)
 0.1000 !Cutoff for bond order*100 (cutoff)
 2.1365 !p(coa4)
 0.6991 !p(ovun4)
50.0000 !p(ovun3)
 1.8512 !p(val8)
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 0.0000 !not used
 2.6962 !p(coa3)
4      ! Nr of atoms; atomID;ro(sigma); Val;atom
mass;Rvdw;Dij;gamma;ro(pi);Val(e)
      alfa;gamma(w);Val(angle);p(ovun5);n.u.;chiEEM;etaEEM;n.u.
      ro(pipi);p(lp2);Heat increment;p(boc4);p(boc3);p(boc5),n.u.;n.u.
      p(ovun2);p(val3);n.u.;Val(boc);p(val5);n.u.;n.u.;n.u.
C      1.3825   4.0000  12.0000   1.9133   0.1853   0.9000   1.1359   4.0000
      9.7602   2.1346   4.0000  33.2433  79.5548   5.8678   7.0000   0.0000
      1.2104   0.0000 199.0303   8.6991  34.7289  13.3894   0.8563   0.0000
      -2.8983   2.5000   1.0564   4.0000   2.9663   0.0000   0.0000   0.0000
H      0.7853   1.0000   1.0080   1.5904   0.0419   1.0206  -0.1000   1.0000
      9.3557   5.0518   1.0000   0.0000 121.1250   5.3200   7.4366   1.0000
      -0.1000   0.0000  62.4879   1.9771   3.3517   0.7571   1.0698   0.0000
      -15.7683   2.1488   1.0338   1.0000   2.8793   0.0000   0.0000   0.0000
O      1.2477   2.0000  15.9990   1.9236   0.0904   1.0503   1.0863   6.0000
      10.2127   7.7719   4.0000  36.9573 116.0768   8.5000   8.9989   2.0000
      0.9088   1.0003  60.8726  20.4140   3.3754   0.2702   0.9745   0.0000
```

		-3.6141	2.7025	1.0493	4.0000	2.9225	0.0000	0.0000	0.0000
V		2.3008	3.0000	50.9415	1.8842	0.2471	0.5518	0.1000	5.0000
		12.3750	5.2538	3.0000	0.0000	0.0000	2.1056	5.4975	0.0000
		-1.0000	0.0000	117.6300	23.2444	6.5966	1.0000	0.8563	0.0000
		-3.2973	2.3344	1.0338	6.0000	3.6411	0.0000	0.0000	0.0000
X		-0.1000	2.0000	1.0080	2.0000	0.0000	1.0000	-0.1000	6.0000
		10.0000	2.5000	4.0000	0.0000	0.0000	8.5000	1.5000	0.0000
		-0.1000	0.0000	-2.3700	8.7410	13.3640	0.6690	0.9745	0.0000
		-11.0000	2.7466	1.0338	6.2998	2.8793	0.0000	0.0000	0.0000

10 ! Nr of bonds;

at1;at2;De(sigma);De(pi);De(pipi);p(be1);p(bo5);l3corr;n.u.;p(bo6),p(ovun1)

p(be2);p(bo3);p(bo4);n.u.;p(bo1);p(bo2)

1	1	156.5953	100.0397	80.0000	-0.8157	-0.4591	1.0000	37.7369	0.4235
		0.4527	-0.1000	9.2605	1.0000	-0.0750	6.8316	1.0000	0.0000
1	2	170.2316	0.0000	0.0000	-0.5931	0.0000	1.0000	6.0000	0.7140
		5.2267	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0500	6.8315	0.0000	0.0000
2	2	156.0973	0.0000	0.0000	-0.1377	0.0000	1.0000	6.0000	0.8240
		2.9907	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0593	4.8358	0.0000	0.0000
1	3	160.4802	105.1693	23.3059	-0.3873	-0.1613	1.0000	10.8851	1.0000
		0.5341	-0.3174	7.0303	1.0000	-0.1463	5.2913	0.0000	0.0000
3	3	60.1463	176.6202	51.1430	-0.2802	-0.1244	1.0000	29.6439	0.9114
		0.2441	-0.1239	7.6487	1.0000	-0.1302	6.2919	1.0000	0.0000
2	3	180.4373	0.0000	0.0000	-0.8074	0.0000	1.0000	6.0000	0.5514
		1.2490	1.0000	0.0000	1.0000	-0.0657	5.0451	0.0000	0.0000
4	4	36.0707	0.0000	0.0000	0.1764	-0.3000	0.0000	16.0000	0.1020
		0.0350	-0.3000	16.0000	1.0000	-0.0587	8.4813	0.0000	0.0000
3	4	137.8828	56.4570	0.0000	0.0310	-0.3000	1.0000	36.0000	0.2355
		0.7943	-0.2977	15.9401	1.0000	-0.1952	5.0015	1.0000	0.0000
2	4	112.6739	0.0000	0.0000	0.1669	-0.3000	0.0000	36.0000	0.0751
		-0.4510	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.0822	6.4179	0.0000	0.0000
1	4	130.2004	0.0000	0.0000	-0.3153	-0.3000	1.0000	36.0000	0.6315
		0.9750	-0.2500	20.0000	1.0000	-0.1203	6.5055	1.0000	0.0000

6 ! Nr of off-diagonal terms.

at1;at2;Dij;RvdW;alfa;ro(sigma);ro(pi);ro(pipi)

1	2	0.1219	1.4000	9.8442	1.1203	-1.0000	-1.0000
2	3	0.0344	1.6800	10.3247	0.9013	-1.0000	-1.0000
1	3	0.1131	1.8523	9.8442	1.2775	1.1342	1.0621
1	4	0.1005	1.7015	12.0291	1.8429	-1.0000	-1.0000
2	4	0.1211	1.6565	10.7328	1.4538	-1.0000	-1.0000
3	4	0.0807	1.9659	10.0132	1.6500	1.5900	-1.0000

35 ! Nr of angles.

at1;at2;at3;Thetao,o;p(val1);p(val2);p(coal);p(val7);p(pen1);p(val4)

1	1	1	67.2326	22.0695	1.6286	0.0000	1.7959	15.4141	1.8089
1	1	2	65.2527	14.3185	6.2977	0.0000	0.5645	0.0000	1.1530
2	1	2	70.0840	25.3540	3.4508	0.0000	0.0050	0.0000	3.0000
1	2	2	0.0000	0.0000	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	2	1	0.0000	3.4110	7.7350	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
2	2	2	0.0000	27.9213	5.8635	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
1	1	3	49.5561	7.3771	4.9568	0.0000	0.7533	15.9906	1.0010
3	1	3	77.1171	39.8746	2.5403	-24.3902	1.7740	-42.9758	2.1240
2	1	3	65.0000	14.2057	4.8649	0.0000	0.3504	0.0000	1.7185
1	3	1	74.3994	44.7500	0.7982	0.0000	3.0000	0.0000	1.0528
1	3	3	77.9854	36.6201	2.0201	0.0000	0.7434	67.0264	3.0000
3	3	3	80.7324	30.4554	0.9953	0.0000	1.6310	50.0000	1.0783
1	3	2	71.5018	21.7062	0.4735	0.0000	0.5186	0.0000	1.1793
2	3	3	84.9468	23.3540	1.5057	0.0000	2.6374	0.0000	1.3023
2	3	2	77.0645	10.4737	1.2895	0.0000	0.9924	0.0000	1.1043
1	2	3	0.0000	5.0000	3.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.5000
3	2	3	0.0000	0.0148	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
2	2	3	0.0000	9.7025	6.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0400
3	4	3	68.9780	25.4118	1.8941	0.0000	2.6245	0.0000	1.0010
4	3	4	57.5689	6.3911	5.0236	0.0000	1.0358	0.0000	2.5634
3	3	4	54.0069	6.0419	1.1089	0.0000	2.7213	0.0000	2.4129
1	3	4	67.7243	5.1160	5.6779	0.0000	1.0536	0.0000	1.0010
2	3	4	100.0000	12.7432	1.5773	0.0000	1.3885	0.0000	3.8809

3	4	4	22.6212	4.2523	3.3011	0.0000	1.1185	0.0000	2.2035	
1	1	4	70.0000	14.3983	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
2	1	4	70.0000	7.0700	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
3	1	4	70.8486	39.9493	1.8219	0.0000	1.0000	0.0000	1.1696	
1	2	4	0.0000	5.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
2	2	4	0.0000	9.0000	2.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
3	2	4	0.0000	5.9843	1.8885	0.0000	1.0000	0.0000	1.2456	
1	4	1	70.0000	23.6766	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
1	4	2	70.0000	6.0546	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
1	4	3	64.7486	23.1702	3.0204	0.0000	1.0000	0.0000	1.0937	
2	4	2	65.0000	11.6200	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.2000	
2	4	3	60.4260	22.5101	3.6090	0.0000	1.0000	0.0000	1.2953	
33	!	Nr of torsions.	at1;at2;at3;at4;;V1;V2;V3;p(tor1);p(cot1);n.u;n.u.							
1	1	1	1	-0.2500	11.5822	0.1879	-4.7057	-2.2047	0.0000	0.0000
1	1	1	2	-0.2500	31.2596	0.1709	-4.6391	-1.9002	0.0000	0.0000
2	1	1	2	-0.1770	30.0252	0.4340	-5.0019	-2.0697	0.0000	0.0000
1	1	1	3	-0.7098	22.2951	0.0060	-2.5000	-2.1688	0.0000	0.0000
2	1	1	3	-0.3568	22.6472	0.6045	-4.0088	-1.0000	0.0000	0.0000
3	1	1	3	-0.0528	6.8150	0.7498	-5.0913	-1.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	1	2.0007	25.5641	-0.0608	-2.6456	-1.1766	0.0000	0.0000
1	1	3	2	-1.1953	42.1545	-1.0000	-8.0821	-1.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	1	-0.9284	34.3952	0.7285	-2.5440	-2.4641	0.0000	0.0000
2	1	3	2	-2.5000	79.6980	1.0000	-3.5697	-2.7501	0.0000	0.0000
1	1	3	3	-0.0179	5.0603	-0.1894	-2.5000	-2.0399	0.0000	0.0000
2	1	3	3	-0.5583	80.0000	1.0000	-4.4000	-3.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	1	-2.5000	76.0427	-0.0141	-3.7586	-2.9000	0.0000	0.0000
3	1	3	2	0.0345	78.9586	-0.6810	-4.1777	-3.0000	0.0000	0.0000
3	1	3	3	-2.5000	66.3525	0.3986	-3.0293	-3.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	1	2.5000	-0.5332	1.0000	-3.5096	-2.9000	0.0000	0.0000
1	3	3	2	-2.5000	3.3219	0.7180	-5.2021	-2.9330	0.0000	0.0000
2	3	3	2	2.2500	-6.2288	1.0000	-2.6189	-1.0000	0.0000	0.0000
1	3	3	3	0.0531	-17.3983	1.0000	-2.5000	-2.1584	0.0000	0.0000
2	3	3	3	0.4723	-12.4144	-1.0000	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
3	3	3	3	-2.5000	-25.0000	1.0000	-2.5000	-1.0000	0.0000	0.0000
0	1	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	2	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	2	3	0	0.0000	0.1000	0.0200	-2.5415	0.0000	0.0000	0.0000
0	1	1	0	0.0000	50.0000	0.3000	-4.0000	-2.0000	0.0000	0.0000
0	3	3	0	0.5511	25.4150	1.1330	-5.1903	-1.0000	0.0000	0.0000
2	3	4	3	0.6439	21.4220	-0.6344	-5.5022	0.0000	0.0000	0.0000
1	3	4	3	-0.5000	26.4579	-1.0000	-6.1063	0.0000	0.0000	0.0000
1	1	3	4	-0.5000	5.9300	-1.0000	-6.1328	0.0000	0.0000	0.0000
2	1	3	4	1.5000	13.6826	0.1478	-2.9478	0.0000	0.0000	0.0000
4	3	3	4	-0.0641	59.7588	-1.0000	-3.5975	0.0000	0.0000	0.0000
3	3	4	3	1.5000	51.9995	0.4171	-2.5000	0.0000	0.0000	0.0000
4	3	4	3	0.0000	0.0000	0.0000	-9.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	!	Nr of hydrogen bonds.	at1;at2;at3;r(hb);p(hb1);p(hb2);p(hb3)							
3	2	3		2.1082	-2.5000	3.0000	23.0000			